



ELSEVIER

Available online at [www.sciencedirect.com](http://www.sciencedirect.com)

SCIENCE @ DIRECT®

C. R. Physique 5 (2004) 521–530



Microfluidics/Microfluidique

# Effets de raréfaction dans les micro-écoulements gazeux

Stéphane Colin\*, Lucien Baldas

Laboratoire de génie mécanique de Toulouse, INSA, 135, avenue de Rangueil, 31077 Toulouse cedex 4, France

Disponible sur Internet le 28 mai 2004

Présenté par Guy Laval

## Résumé

L'étude des écoulements de gaz dans les microsystèmes nécessite la prise en compte des effets de raréfaction. Après avoir présenté les échelles de longueur caractéristiques des micro-écoulements gazeux et défini les différents régimes d'écoulement rencontrés, nous exposons les méthodes analytiques de calcul du régime d'écoulement glissant, le plus fréquemment rencontré dans les microsystèmes fluidiques. Les différentes méthodes de résolution numérique des micro-écoulements gazeux sont ensuite passées en revue, avec une attention particulière pour la simulation directe de Monte Carlo. La dernière partie est consacrée à quelques applications spécifiques de micropompage d'origine thermique liées à la raréfaction des écoulements.

**Pour citer cet article :** S. Colin, L. Baldas, C. R. Physique 5 (2004).

© 2004 Académie des sciences. Publié par Elsevier SAS. Tous droits réservés.

## Abstract

**Rarefaction effects in gaseous microflows.** Studying gaseous flows in microsystems requires that rarefaction effects be taken into account. The significant length scales for gaseous microflows and the encountered flow regimes are presented. The analytical methods for the modeling of the slip flow regime, frequent in microfluidic applications, are detailed. Numerical methods for the simulation of micro gaseous flows are also examined, with emphasis on the Direct Simulation Monte Carlo method. Finally, some specific applications of thermal micropumping based on rarefaction effects are presented. **To cite this article:** S. Colin, L. Baldas, C. R. Physique 5 (2004).

© 2004 Académie des sciences. Publié par Elsevier SAS. Tous droits réservés.

**Mots-clés :** Raréfaction ; Microfluidique ; Nombre de Knudsen ; Écoulement glissant ; Micropompage thermique

**Keywords:** Rarefaction; Microfluidics; Knudsen number; Slip flow; Thermal micropumping

## 1. Introduction

En microfluidique, la connaissance des micro-écoulements gazeux est actuellement plus avancée que celle des micro-écoulements liquides. En ce qui concerne les gaz, la problématique est en effet plus clairement identifiée : le principal micro-effet résultant du confinement poussé est la raréfaction de l'écoulement. L'analogie est forte (mais pas totale) entre écoulements gazeux à basse pression, étudiés de façon extensive depuis plus d'un demi-siècle, notamment pour leurs applications dans le domaine spatial, et les écoulements internes dans des structures dont les dimensions caractéristiques sont de l'ordre du micromètre.

\* Auteur correspondant.

Adresse e-mail : [stephane.colin@insa-tlse.fr](mailto:stephane.colin@insa-tlse.fr) (S. Colin).

## 2. Effet d'échelle et raréfaction

La modélisation des écoulements gazeux nécessite la prise en compte de plusieurs échelles de longueur caractéristiques. A l'échelle moléculaire, la comparaison du diamètre moyen des molécules  $d$  et de la distance intermoléculaire moyenne  $\delta$  permet d'introduire la notion de gaz *dilué* pour lequel

$$\frac{\delta}{d} \gg 1. \quad (1)$$

Sous cette hypothèse, les collisions binaires sont beaucoup plus probables que les collisions multiples. Lorsque le critère (1) n'est pas vérifié, le gaz est qualifié de *dense*.

Le libre parcours moyen  $\lambda$  des molécules (distance moyenne parcourue par une molécule entre deux chocs) fournit une troisième échelle caractéristique, liée au deux premières. Pour un gaz dilué *simple*, c'est-à-dire constitué de molécules identiques (assimilées à des sphères rigides),  $\lambda = 1/(\sqrt{2}\pi d^2 n)$  où  $n = \delta^{-3}$  est la concentration moléculaire.

Pour la modélisation d'un écoulement gazeux, l'approche continue, lorsqu'elle est possible, est très commode car elle gomme les discontinuités moléculaires par une moyenne macroscopique effectuée sur un petit volume, le volume élémentaire représentatif (VER). L'approche continue requiert l'équilibre thermodynamique du VER, ce qui nécessite des temps caractéristiques de l'écoulement suffisamment grands devant le temps caractéristique des collisions intermoléculaires  $\tau = \lambda/c$ , défini à partir de la vitesse quadratique moyenne des molécules  $c = \sqrt{3rT}$ , en notant  $r$  la constante du gaz et  $T$  la température. Pour que cet équilibre thermodynamique local soit respecté, le nombre de collisions doit également être suffisant dans le VER ; le libre parcours moyen doit donc être petit devant la longueur caractéristique  $l_{\text{VER}}$  du VER, elle-même suffisamment petite devant la longueur caractéristique  $L$  du volume d'étude, ce qui nécessite un nombre de Knudsen

$$Kn = \frac{\lambda}{L} \ll 1. \quad (2)$$

Le nombre de Knudsen, qui caractérise la raréfaction de l'écoulement, peut par ailleurs s'exprimer en fonction du nombre de Mach  $Ma$  et du nombre de Reynolds  $Re$ , par  $Kn = \sqrt{\frac{\gamma\pi}{2}} \frac{Ma}{Re}$ , ce qui montre le lien entre effets de raréfaction et de compressibilité, ces derniers devant être pris en compte lorsque  $Ma > 0,2$ . Enfin, il est nécessaire que les grandeurs macroscopiques ne soient pas trop perturbées par les fluctuations microscopiques. On peut considérer que la prise en compte de 10 000 molécules conduit à des fluctuations statistiques de l'ordre de 1 % lors de la définition des grandeurs macroscopiques [1]. Un tel niveau de fluctuations nécessite un VER de longueur caractéristique minimale  $l_{\text{VER}}$  tel que  $l_{\text{VER}}/\delta = 10^{4/3} \approx 22$ . Le volume d'étude doit donc avoir une longueur caractéristique supérieure, soit

$$\frac{L}{\delta} \gg 10^{4/3}, \quad (3)$$

pour que l'écoulement puisse y être modélisé avec précision par une approche continue.

Pour fixer les idées, pour de l'air dans les conditions standard ( $T = 273,15$  K et  $P = 1,013 \times 10^5$  Pa),  $d = 0,37$  nm,  $\delta = 3,3$  nm,  $\lambda = 65$  nm,  $n = 2,7 \times 10^{25}$  m<sup>-3</sup>,  $\tau = 1,34 \times 10^{-10}$  s et  $l_{\text{VER}} = 72$  nm, valeur très proche de celle du libre parcours moyen  $\lambda$ .

Les limites correspondant aux Éqs. (1) à (3) sont représentées sur la Fig. 1, avec les valeurs indicatives proposées par Bird [2] :  $\delta/d = 7$ ,  $L/\delta = 100$  et  $\lambda/L = 0,1$ . La figure montre que la similitude n'est pas totale entre écoulements confinés et écoulements basse pression, le nombre de Knudsen n'étant pas le seul paramètre à prendre en compte.

Il est pourtant commode de différencier les régimes d'écoulement en fonction de  $Kn$ , et la classification suivante, teintée d'empirisme, est classiquement retenue :

- pour  $Kn < 10^{-3}$ , le régime est *continu* (**C**), l'écoulement est alors correctement modélisé par les équations de Navier–Stokes associées aux conditions classiques de continuité de la température et de la vitesse à la paroi ;
- pour  $10^{-3} < Kn < 10^{-1}$ , le régime est *glissant* (**G**), les équations de Navier–Stokes demeurent applicables, mais il est nécessaire de prendre en compte un saut de température et de vitesse à la paroi, résultant du déséquilibre thermodynamique qui apparaît en priorité près des frontières solides, là où le gaz n'occupe qu'un demi-espace ;
- pour  $10^{-1} < Kn < 10$ , le régime est *de transition* (**T**), l'approche continue traduite par les équations de Navier–Stokes n'est plus valable, mais les collisions intermoléculaires ne sont pas encore totalement négligeables et doivent être prises en compte ;
- pour  $Kn > 10$ , le régime est *moléculaire libre* (**M**), les collisions entre molécules sont alors d'occurrence négligeable, comparées aux collisions entre molécules et paroi.

Les limites de ces différents régimes ne sont qu'indicatives et peuvent varier d'un cas de figure à un autre, en partie car le choix de la longueur caractéristique  $L$  est rarement unique. Dans les configurations géométriques complexes, il est d'ailleurs

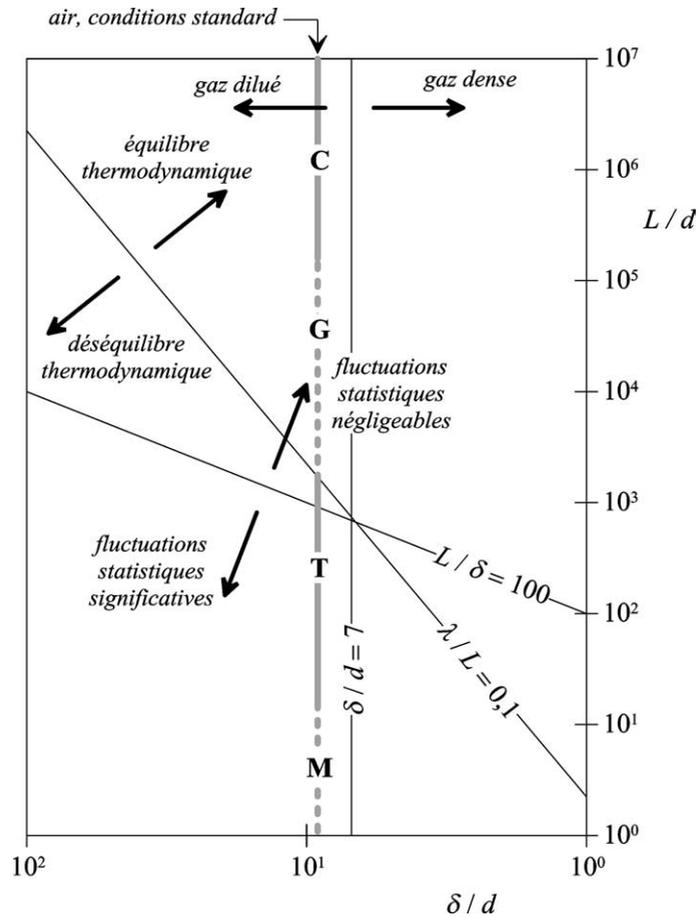


Fig. 1. Limites des principales approximations pour la modélisation des micro-écoulements gazeux, d'après Bird [2].

préférable de définir  $L$  à partir de gradients locaux (par exemple de la masse volumique  $\rho$  :  $L = 1/|\nabla\rho/\rho|$ ) plutôt qu'à partir de simples considérations géométriques [3]; le nombre de Knudsen bâti sur cette longueur caractéristique est alors appelé nombre de raréfaction local [4].

La Fig. 1 situe ces différents régimes pour de l'air dans les conditions standard, qu'on peut alors grossièrement considérer comme dilué, sur une droite verticale grisée. La correspondance avec la longueur caractéristique  $L$  exprimée en micromètres est donnée par la Fig. 2, qui situe les plages typiquement couvertes par les microsystèmes présentés dans la littérature. On constate que la plupart des microsystèmes utilisant des gaz fonctionnent dans le régime glissant, ou relèvent du début du régime de transition. Dans des configurations simples, de tels écoulements peuvent être modélisés de manière analytique ou semi-analytique (voir la Section 3). Le cœur du régime de transition correspond à des écoulements plus spécifiques, mettant en jeu des dimensions inférieures à la centaine de nanomètres, comme par exemple entre disque dur et tête de lecture ou d'écriture. Les seules approches théoriques sont alors moléculaires et requièrent une simulation numérique (voir la Section 4). Enfin, sous l'effet conjugué d'une basse pression et d'un confinement poussé, on peut rencontrer dans les microsystèmes des régimes plus raréfiés encore, notamment dans des dispositifs dédiés à la génération de vide (voir la Section 5).

### 3. Régime d'écoulement glissant

Pour sa forte occurrence dans les microsystèmes utilisant des gaz, le régime glissant a été étudié en détails, d'autant qu'il donne lieu à des modèles relativement simples, favorisant l'optimisation des microsystèmes concernés. Les premières conditions aux limites traduisant un glissement de vitesse à la paroi ont été établies par Maxwell en 1879 :

$$U_t - U_p = \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} Kn \frac{\partial U_t}{\partial n} + \frac{3}{2\pi} \frac{\gamma - 1}{\gamma} \frac{Kn^2 Re}{Ec} \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (4)$$

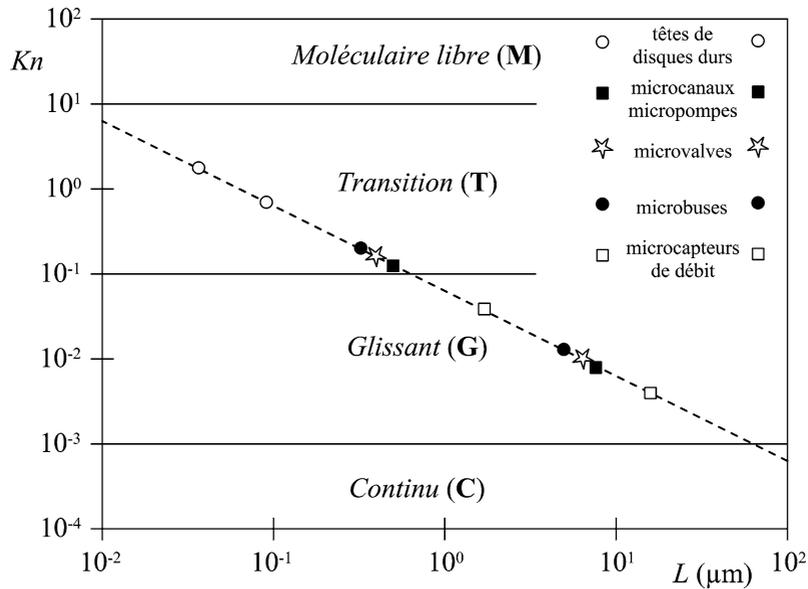


Fig. 2. Dimensions caractéristiques des microsystèmes à fluide typiques et plage de Knudsen correspondant aux conditions standard, d'après Karniadakis et Beskok [1].

et celles traduisant un saut de température par Smoluchowski en 1898 :

$$T - T_p = \frac{2 - \sigma_T}{\sigma_T} \frac{2\gamma}{\gamma + 1} \frac{Kn}{Pr} \frac{\partial T}{\partial n}. \quad (5)$$

Elles sont écrites ici sous forme adimensionnelle. L'indice  $p$  est relatif à la paroi, et les indices  $t$  et  $n$  aux directions tangentielle et normale (sortante à la paroi) respectivement. Dans le fluide, au contact de la paroi, la vitesse tangentielle est donc notée  $U_t$  et la température  $T$ . Le rapport des capacités thermiques massiques est noté  $\gamma$ . Les nombres de Reynolds  $Re$ , de Prandtl  $Pr$  et d'Eckert  $Ec$  jouent un rôle lorsque l'écoulement n'est pas isotherme. Il n'y a là en fait que trois paramètres adimensionnels indépendants ( $Pr$ ,  $Re$  et  $Kn$ ), puisque  $Ec = (\gamma - 1) \frac{T_0}{\Delta T} Ma^2$  et  $Kn = \sqrt{\frac{\gamma\pi}{2}} \frac{Ma}{Re}$ . Les coefficients d'accommodation pour la quantité de mouvement tangentielle  $\sigma_v$  et pour l'énergie thermique  $\sigma_T$  rendent compte des interactions des molécules avec la paroi. Leur détermination précise demeure problématique, car ils dépendent de la nature du gaz et de la paroi, ainsi que de l'état de surface de celle-ci. Une réflexion purement spéculaire correspond à  $\sigma_v = 0$ , alors qu'une réflexion totalement diffuse correspond à  $\sigma_v = 1$ . De même, une molécule acquiert après son choc avec la paroi la température de cette dernière si  $\sigma_T = 1$  et elle conserve sa température initiale si  $\sigma_T = 0$ .

Le deuxième terme du second membre de l'Éq. (4) est responsable du *thermal creep* ou transpiration thermique, phénomène à l'origine d'une mise en mouvement du gaz en présence d'un simple gradient tangentiel de température, l'écoulement s'effectuant des basses vers les hautes températures. En l'absence de ce gradient tangentiel pariétal ( $\partial T / \partial t = 0$ ), les conditions aux limites (4) et (5) sont dites au premier ordre ( $\partial(Kn)$ ) : le saut de vitesse (respectivement de température) est alors proportionnel au gradient transversal de vitesse (respectivement de température) et au nombre de Knudsen  $Kn$ .

Un des intérêts majeurs du régime glissant tient à la possibilité d'écrire des modèles analytiques ou semi-analytiques permettant de calculer vitesses et débit pour des écoulements localement pleinement développés et isothermes entre plaques planes parallèles [5] ou dans des conduites cylindriques de section simple (circulaire [5], annulaire [6], rectangulaire [6,7], ...). Ces modèles s'avèrent assez précis pour des nombres de Knudsen limités, typiquement jusque 0,1 environ [8–11], avec des valeurs de  $\sigma_v$  variables selon les auteurs, mais généralement proches de l'unité. Pour  $Kn > 0,1$ , des études expérimentales [12] ou numériques par simulation directe de Monte Carlo (DSMC) [13] mettent en évidence des écarts significatifs avec les modèles fondés sur des conditions aux limites d'ordre 1. Depuis 1947, plusieurs auteurs ont proposé des conditions aux limites au second ordre, espérant ainsi étendre la validité du régime glissant à des nombres de Knudsen plus élevés. Les conditions de glissement au second ordre prennent des formes plus ou moins complexes, qu'il est difficile de regrouper sous une écriture unique. En effet, selon les hypothèses formulées, les termes d'ordre deux ( $\partial(Kn^2)$ ) peuvent être dépendants de  $\sigma_v$  [1,14] et faire intervenir

Tableau 1  
Coefficients relatifs aux principaux modèles de conditions aux limites d'ordre 2 proposés dans la littérature

Auteur, Date [Référence]	$A_1$	$A_2$
Maxwell, 1879 [5]	1	0
Schamberg, 1947 [1]	1	$-5\pi/12$
Chapman et Cooling, 1952 [14]	$\kappa_0 (\approx 1)$	$\kappa_0^2/2 (\approx 1/2)$
Cercignani, 1963 [1]	1,1466	-0,9756
Deissler, 1964 [15]	1	-9/8
Hsia et Domoto, 1983 [1]	1	-0,5
Mitsuya, 1993 [54]	1	-2/9
Karniadakis et Beskok, 2002 [1]	1	1/2

Tableau 2  
Données expérimentales récentes relatives à des écoulements de gaz dans les microcanaux

Auteur, Date [Réf.]	Dimensions des microcanaux			Conditions d'expérience		Confrontation théorique	
	$l$ ( $\mu\text{m}$ )	$h$ ( $\mu\text{m}$ )	$a$ (%)	Gaz	$Kn_0$	$\sigma_v$	Modèle
Arkilic et al., 2001 [8]	7490	1,33	2,5	Ar	0,05–0,41	0,8	Plan, 1 <sup>er</sup> ordre
				N <sub>2</sub>	0,05–0,34	0,8	
				CO <sub>2</sub>	0,03–0,44	0,8	
Colin et al., 2004 [19]	5000	0,54–4,48	1,1–8,7	N <sub>2</sub>	0,002–0,16	0,93	[17] : Rectangulaire, 2nd ordre, et CL de Deissler
				He	0,029–0,47	0,93	
Maurer et al., 2003 [18]	10000	1,14	0,6	N <sub>2</sub>	0,054–1,1	0,87	Plan, 2nd ordre, $A_2 = -0,26_{(\text{He})}$ ou $-0,23_{(\text{N}_2)}$
				He	0,17–1,46	0,91	

des dérivées secondes tangentielles  $\partial^2 U / \partial t^2$  [15]. Dans le cas simple d'un écoulement établi sur une plaque plane, les dérivées secondes tangentielles sont nulles, et on peut comparer la plupart des modèles d'ordre 2, qui prennent la forme générique

$$U_t - U_p = A_1 Kn \frac{\partial U_t}{\partial n} + A_2 Kn^2 \frac{\partial^2 U_t}{\partial n^2}. \quad (6)$$

Dans le cas particulier d'une réflexion parfaitement diffuse ( $\sigma_v = 1$ ), les coefficients  $A_1$  et  $A_2$  proposés dans la littérature sont comparés (Tableau 1). On constate, essentiellement sur le terme d'ordre 2, des différences quantitativement significatives. D'autre part, certains modèles d'ordre 2, établis à partir d'une simple extension mathématique de la condition de Maxwell, prévoient une diminution du glissement par rapport au modèle d'ordre 1, tandis que d'autres prévoient une augmentation du glissement. Ces derniers modèles, fondés sur une approche physique du comportement du gaz à proximité de la paroi, vont dans le sens de récentes constatations expérimentales. En 2001, Lalonde [16] a effectué des mesures de débits gazeux dans des microcanaux, qui ont permis d'établir de façon indirecte que pour des nombres de Knudsen  $Kn_0$  en sortie de microcanal supérieurs à 0,05, un modèle à l'ordre 1 sous-estimait le glissement. Un modèle d'ordre 2 fondé sur les conditions aux limites de Deissler [17] s'est montré en excellent accord avec ces mesures jusqu'à  $Kn_0 \approx 0,25$ . Cette tendance a été confirmée en 2003 par Maurer et al. [18]. Les dernières données expérimentales précises fournies dans la littérature (Tableau 2) vont dans le même sens ; elles concernent différents gaz et sont relatives à des microcanaux de sections rectangulaires, de longueurs  $l$  et profondeurs  $h$  comparables, mais réalisés de différentes manières. Arkilic et al. [8] ont mis en regard deux plaques de silicium, Colin et al. [19] ont utilisé des canaux gravés par attaque plasma (DRIE) dans du silicium et recouverts d'une plaque de verre scellée par collage anodique, et Maurer et al. [18] ont étudié des canaux gravés dans du verre et recouverts de silicium. La comparaison fine des mesures fournies par ces différents auteurs est également délicate du fait que les rapports de forme  $a$  des sections (rapports de la profondeur  $h$  sur la largeur  $b$ ) diffèrent d'une étude à l'autre. Lorsque  $a$  est supérieur à 1 %, les effets des parois latérales ne sont plus négligeables, et le modèle d'écoulement plan doit être abandonné au profit d'un modèle adapté aux sections rectangulaires [17]. Les deux derniers travaux [18,19] confirment cependant qu'un modèle glissant adéquat, fondé sur des conditions aux limites du second ordre, peut être précis pour des nombres de Knudsen élevés, relevant habituellement du régime dit de transition.

Il est à noter que la résolution des équations de Navier–Stokes avec les conditions du second ordre résumées dans le Tableau 1 peut s'avérer problématique dans certaines configurations géométriques, qu'il s'agisse de trouver des solutions analytiques ou numériques. En effet, les équations de Navier–Stokes correspondent à une approximation de l'équation de Boltzmann du premier ordre en Knudsen ( $\vartheta(Kn)$ ), et ne devraient en toute rigueur être associées qu'à des conditions aux limites du premier

ordre [1]. L'intérêt évident d'utiliser des conditions d'ordre supérieur a conduit certains auteurs à proposer des conditions nouvelles, mieux adaptées aux équations de Navier–Stokes. Ainsi, Beskok et Karniadakis [20] suggèrent une forme d'ordre supérieur en  $Kn$  qui ne fait intervenir que la dérivée première de la vitesse et un paramètre empirique  $c$  :

$$U_t - U_p = \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \frac{Kn}{1 - cKn} \frac{\partial U_t}{\partial n}. \quad (7)$$

Xue et Fan [21] proposent quant à eux

$$U_t - U_p = \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \tanh(Kn) \frac{\partial U_t}{\partial n}, \quad (8)$$

qui donne des résultats proches de ceux calculés par DSMC jusqu'à des nombres de Knudsen élevés, de l'ordre de 3. D'autres conditions aux limites hybrides, telles que celle de Jie et al. [22]

$$U_t - U_p = \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \left[ Kn \frac{\partial U_t}{\partial n} + \frac{Kn}{2} \left( Re \frac{\partial P}{\partial t} \right) \right], \quad (9)$$

ont également été proposées pour offrir une solution numériquement plus stable, tout en donnant sur les cas testés des résultats comparables à ceux de l'Éq. (7).

Une dernière possibilité consiste à conserver la condition de glissement de Maxwell, mais en remplaçant les équations de Navier–Stokes (NS) par les équations quasi-hydrodynamiques (QHD) [23]. Ces dernières diffèrent des équations de Navier–Stokes par un petit paramètre, qui introduit des corrections sur le débit du second ordre en  $Kn$  [24]. Le modèle QHD avec des conditions aux limites du premier ordre (noté QHD1) prévoit des débits proches de ceux calculés par le modèle NS avec des conditions aux limites du second ordre de Deissler (noté NS2) [25]. Par exemple, pour un écoulement entre plaques planes parallèles, avec un rapport des pressions amont/aval noté  $\Pi$ , les débits massiques adimensionnés par celui d'un écoulement non raréfié (NS0),

$$q_{\text{QHD1}}^* = \frac{q_{\text{QHD1}}}{q_{\text{NS0}}} = 1 + 12 \frac{2 - \sigma}{\sigma} \frac{Kn_0}{\Pi + 1} + \frac{48}{\pi Sc} Kn_0^2 \frac{\ln \Pi}{\Pi^2 - 1} \quad (10)$$

et

$$q_{\text{NS2}}^* = \frac{q_{\text{NS2}}}{q_{\text{NS0}}} = 1 + 12 \frac{2 - \sigma}{\sigma} \frac{Kn_0}{\Pi + 1} + 27 Kn_0^2 \frac{\ln \Pi}{\Pi^2 - 1}, \quad (11)$$

ne diffèrent que par le coefficient du terme d'ordre 2 ( $\vartheta(Kn^2)$ ). Le nombre de Schmidt  $Sc$  valant 0,77 pour un gaz monoatomique et 0,74 pour un gaz diatomique, l'écart entre les Éqs. (10) et (11) portant sur le dernier terme est de l'ordre de 25 %.

#### 4. Méthodes numériques et régime de transition

Les méthodes employées pour la simulation numérique des écoulements gazeux dépendent évidemment du degré de raréfaction de l'écoulement considéré. Ainsi, tant que le régime est continu ( $Kn < 10^{-3}$ ), la résolution numérique des équations de Navier–Stokes par les méthodes classiques (différences finies, volumes finis, méthodes spectrales, ...) ne pose pas de problème particulier lié aux dimensions micrométriques du domaine de calcul.

En régime glissant, c'est-à-dire grossièrement lorsque  $10^{-3} < Kn < 10^{-1}$ , l'approche continue reste valable. Il est cependant nécessaire d'observer quelques précautions pour la mise en œuvre des conditions aux limites de glissement à la paroi. Karniadakis et Beskok [1] ont ainsi développé un code par éléments spectraux 'μflow' qui permet, à partir de la résolution des équations de Navier–Stokes, la simulation des écoulements gazeux dans les régimes continu et glissant.

Lorsque la raréfaction augmente (typiquement pour  $Kn > 10^{-1}$ ), l'approche moléculaire est requise. L'écoulement peut être modélisé à partir de l'équation de Boltzmann

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} + F \frac{\partial f}{\partial v} = Q(f, f^*) \quad (12)$$

qui décrit l'évolution spatio-temporelle de la fonction de distribution de vitesse  $f(x, v, t)$ ,  $x$  représentant la position,  $v$  la vitesse des molécules et  $F$  les forces extérieures de volume. Le second membre de l'équation est relatif aux collisions intermoléculaires, supposées binaires. Cette équation est valable quel que soit le degré de raréfaction puisque l'hypothèse d'équilibre thermodynamique local n'est pas utilisée. Cependant, la formulation intégrale du terme  $Q(f, f^*)$  est complexe dans le cas général [1], du fait de non linéarités et d'un grand nombre de variables indépendantes. La résolution numérique directe de cette équation reste donc réservée à des problèmes présentant une géométrie simple ou pour lesquels le degré de raréfaction permet des simplifications. Ainsi, le terme relatif aux collisions intermoléculaires s'annule en régime moléculaire

libre. De même, lorsque  $Kn \rightarrow 0$ , la méthode des moments de Grad [26] ou celle de Chapman–Enskog [14] permet de résoudre semi-analytiquement l'équation de Boltzmann. Par contre, en régime de transition, sa résolution numérique n'est possible qu'à l'aide de méthodes approchées basées sur la simplification de l'intégrale décrivant les collisions intermoléculaires. Sharipov et Seleznev [27] donnent une description des différentes méthodes utilisables (équation BGK [28], équation de Boltzmann linéarisée [29], ...) et de leur domaine de validité.

Les méthodes dites moléculaires sont en fait mieux adaptées à la simulation du régime de transition. C'est le cas de la simulation numérique directe par méthode de Monte Carlo (DSMC) développée par Bird [2]. Initialement très utilisée pour le calcul des écoulements raréfiés basse pression [30–32], elle trouve aussi un vaste champ d'application en microfluidique [13,33–39].

Le principe consiste, lors d'une expérience numérique, à calculer de manière découplée les collisions intermoléculaires et le mouvement d'un nombre limité de molécules, chacune représentant un grand nombre  $W$  de molécules réelles. Le domaine de calcul est discrétisé en cellules dont la taille doit être de l'ordre de  $\lambda/3$  pour permettre le calcul dans les zones à forts gradients [33]. Le pas de temps  $\delta t$  doit quant à lui rester faible devant la durée moyenne  $\tau$  entre deux collisions. Le calcul comporte trois étapes :

- (i) Détermination du mouvement des particules pendant le pas de temps  $\delta t$ . Les collisions éventuelles molécules/paroi sont aussi calculées (à condition de connaître le coefficient d'accommodation), et les échanges d'énergie et de quantité de mouvement avec la paroi sont enregistrés. A l'issue de cette étape, les positions des molécules dans les cellules sont indexées.
- (ii) Au sein de chaque cellule sont déterminées les collisions intermoléculaires se produisant pendant l'intervalle  $\delta t$ . Ces collisions sont généralement traitées comme des collisions entre sphères rigides. Le nombre de collisions calculées qui doit être représentatif de la fréquence de collision du gaz réel dépend du nombre de molécules présentes dans la cellule, de son volume et du facteur de pondération  $W$ .
- (iii) A chaque pas de temps, les propriétés « moléculaires » de l'écoulement sont enregistrées dans chaque cellule (nombre de molécules, somme des vitesses, des énergies de chaque molécule). A la fin de la simulation, les grandeurs macroscopiques (vitesse, pression, température, ...) sont obtenues par une moyenne temporelle (pour les écoulements stationnaires) ou d'ensemble (sur un grand nombre de simulations pour les écoulements instationnaires) des grandeurs moléculaires enregistrées.

La DSMC est limitée par le fait que les échantillons observés doivent rester de taille raisonnable, pour des raisons de puissance de calcul. L'erreur statistique qui en découle est d'autant plus gênante que la vitesse macroscopique de l'écoulement est faible. Certains auteurs ont cependant développé des modifications de la méthode conventionnelle (DSMC-IP [40], MB-DSMC [41]) pour le calcul des écoulements à faible vitesse. D'autre part, la contrainte sur le pas de temps ( $\delta t < \tau$ ) s'accroît lorsqu'on approche du régime continu. L'application pratique de la DSMC à des écoulements non raréfiés reste donc actuellement impossible. L'augmentation des puissances de calcul permet toutefois de faire reculer régulièrement la limite. De plus, des méthodes de couplage DSMC/équations de Navier–Stokes [42,43] permettent maintenant de simuler des micro-écoulements dans lesquels plusieurs régimes se superposent. Ce genre de problème semble aussi pouvoir se traiter à l'aide de la méthode de Boltzmann en réseau (*lattice Boltzmann method*, LBM) basée sur la résolution, sur un réseau discret couvrant le domaine de calcul, d'une équation simplifiée de Boltzmann. Chen et Doolen [44] en donnent une description détaillée dans leur article, mais les applications aux micro-écoulements sont encore rares [1].

## 5. Micro-écoulements gazeux d'origine thermique et génération de vide

La génération de vide à l'aide de microsystèmes concerne des applications variées, telles que le prélèvement d'échantillons biologiques ou chimiques, ou le maintien et la régulation du niveau de vide dans l'environnement immédiat de certains microsystèmes en cours de fabrication ou d'utilisation. Les propriétés des écoulements raréfiés permettent l'emploi de techniques de pompage n'utilisant pas de parties mécaniques mobiles ou déformables, la mise en mouvement de l'écoulement étant uniquement d'origine thermique.

La technique actuellement la plus étudiée est la technique de pompage par *transpiration thermique*. Le principe de base utilise deux réservoirs de grandes dimensions qui contiennent un gaz et communiquent par un orifice, d'aire  $A$ , dont le diamètre hydraulique est petit devant le libre parcours moyen des molécules. La température dans le réservoir 1 est amenée à une valeur supérieure à celle régnant dans le réservoir 2 ( $T_1 > T_2$ ), par exemple à l'aide d'une résistance électrique. L'analyse des probabilités que des molécules issues d'un des réservoirs traversent l'orifice permet de montrer que si la pression dans les deux

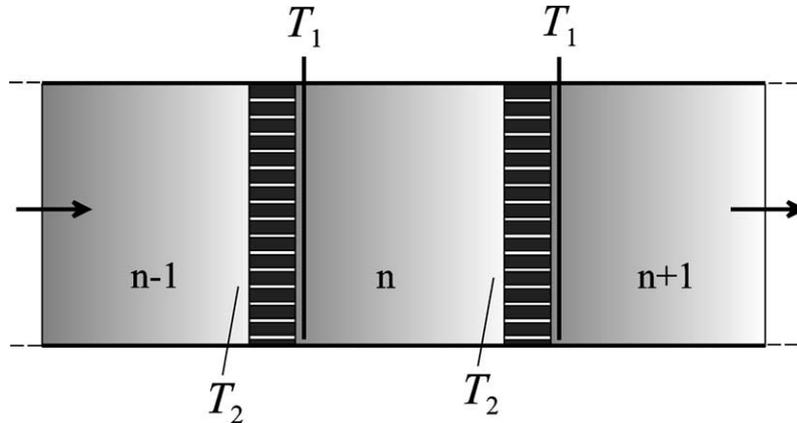


Fig. 3. Micropompe multi étagée à transpiration thermique.

réservoirs est identique ( $P_1 = P_2 = P$ ), il apparaît un flux moléculaire résultant de 2 vers 1 (des basses températures vers les hautes températures) [4,45] :

$$\dot{N}_{2 \rightarrow 1} = A \sqrt{2\pi m k} P \frac{\sqrt{T_1} - \sqrt{T_2}}{\sqrt{T_1 T_2}}, \quad (13)$$

et que si le flux moléculaire résultant est nul, nécessairement les pressions vérifient :

$$\frac{P_1}{P_2} = \sqrt{\frac{T_1}{T_2}}. \quad (14)$$

Dans ces équations,  $m$  représente la masse des molécules et  $k$  la constante de Boltzmann. Si  $P_1$  est compris entre  $P_2$  et  $P_2 \sqrt{T_1/T_2}$ , il apparaît un écoulement de 2 vers 1, avec une baisse de  $P_2$  et/ou une augmentation de  $P_1$  : une pompe élémentaire est ainsi réalisée. Un *compresseur de Knudsen* (Fig. 3) peut alors être fabriqué en plaçant en cascade une série de réservoirs qui communiquent par de très petits orifices et qui présentent une zone froide (à température  $T_2$ ) d'un côté et une chaude (à température  $T_1$ ) de l'autre, grâce à un chauffage local adéquat, positionné en aval immédiat des orifices. Cette configuration multi étagée permet d'atteindre des sauts de pression cumulés importants, tout en conservant un débit suffisant. En pratique, les orifices doivent être remplacés par des microcanaux (Fig. 3), ce qui complique la modélisation [46]. D'autre part, il est généralement difficile de maintenir un écoulement moléculaire libre dans ces microcanaux en même temps qu'un régime continu dans les chambres, qui garantissent un rendement optimal (Éqs. (13) et (14)). Des modèles plus élaborés, fondés sur une linéarisation de l'équation de Boltzmann [47], sont capables de prendre en compte le régime de transition ( $0,05 < Kn < 10$ ), à la fois dans les microcanaux et les réservoirs [48]. Plusieurs études de dimensionnement sont proposées dans la littérature ; elles montrent la faisabilité théorique de micropompes à transpiration thermique. Des premiers prototypes, réalisés à une échelle méso et non micro, ont pu être testés [46,48,49], l'apport thermique se faisant en paroi. Une solution alternative avec apport thermique au sein du gaz a également été proposée [50], mais il n'y a pas encore de résultats expérimentaux publiés sur cette configuration. En fait, beaucoup reste à faire pour l'optimisation théorique et presque tout pour la réalisation effective des micropompes à transpiration thermique à l'aide de techniques de micro-fabrication. Les performances de ces micropompes restent par ailleurs technologiquement limitées, la recherche de niveaux de vide trop poussés pouvant devenir incompatible avec les dimensions internes typiques de microsystèmes [45] : l'écoulement dans les chambres doit en effet rester dans un régime proche du continu, ce qui nécessite des dimensions trop importantes pour les pressions les plus basses.

Une autre technique de pompage, dite à *accommodation thermique*, exploite le fait que les molécules de gaz, lorsqu'elles percutent une paroi parfaitement spéculaire, ont un rebond qui dépend de la température de celle-ci. Quand la paroi est plus chaude, elle leur communique de l'énergie et l'angle de réflexion est en moyenne supérieur à l'angle d'incidence. A l'inverse, quand la paroi est plus froide que les molécules, elles ont un rebond plus tangentiel. Dans un microcanal parfaitement lisse reliant deux réservoirs portés à des températures différentes, il apparaît un écoulement du réservoir chaud vers le réservoir froid [51]. Si la paroi du microcanal est rugueuse, le rebond des molécules est aléatoire et cet effet disparaît. Cet effet est confirmé à l'aide de simulations numériques par DSMC [38]. En connectant deux réservoirs chauds (notés 1 et 3) à un réservoir froid d'un côté par un microcanal lisse (2–1) et de l'autre par un microcanal rugueux (2–3), on crée des sauts de pression entre deux réservoirs consécutifs de même température (Fig. 4). En connectant plusieurs étages de ce type en série, les sauts de pression relatifs à chaque étage sont cumulés et permettent de créer des vides poussés. L'avantage de la pompe à accommodation est qu'elle est opérationnelle sans limitations théoriques vers les basses pressions (les réservoirs n'ayant pas besoin d'être

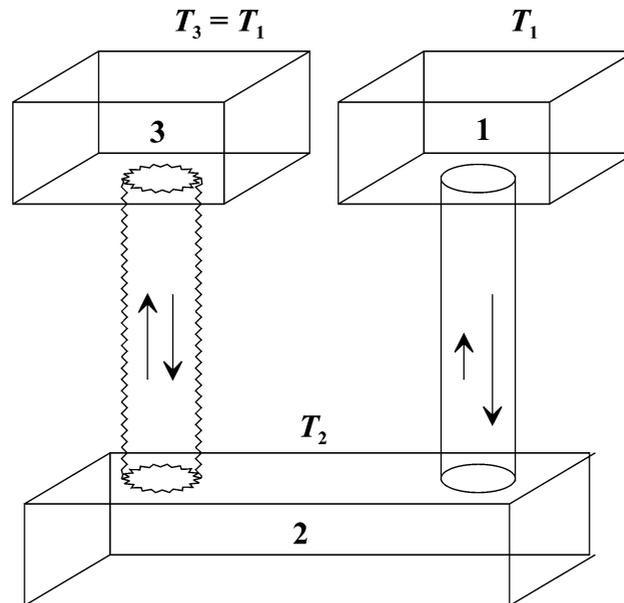


Fig. 4. Etage d'une micropompe à accommodation thermique.

de grandes dimensions devant celles des microcanaux), contrairement au cas de la micropompe à transpiration thermique. En contrepartie, elle demande davantage d'étages pour un rapport de pressions finales identique : un rapport de pressions de 100 demande 125 étages, alors que 10 sont suffisants avec la technique précédente mettant en œuvre des températures comparables. Enfin, même si le concept apparaît séduisant, à notre connaissance il n'est pas fait état dans la littérature de prototype opérationnel de micropompe à accommodation thermique. Le dimensionnement théoriquement le plus performant a été proposé par Hobson [52,53] ; il nécessite une température basse  $T_2 = 77$  K, la température haute étant la température atmosphérique  $T_1 = T_3 = 290$  K.

## Références

- [1] G.E. Karniadakis, A. Beskok, *Microflows: Fundamentals and Simulation*, Springer-Verlag, New York, 2002.
- [2] G.A. Bird, *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*, Clarendon Press, Oxford, 1998.
- [3] M. Gad-el-Hak, The fluid mechanics of microdevices – The Freeman Scholar Lecture, *J. Fluids Engrg.* 121 (1999) 5–33.
- [4] J.-C. Lengrand, Chapter 2 : microécoulements gazeux, in : S. Colin (Ed.), *Microfluidique*, Hermès Science, 2004.
- [5] E.H. Kennard, *Kinetic Theory of Gases*, first ed., McGraw-Hill, New York, 1938.
- [6] W.A. Ebert, E.M. Sparrow, Slip flow in rectangular and annular ducts, *J. Basic Engrg.* 87 (1965) 1018–1024.
- [7] G.L. Morini, M. Spiga, Slip flow in rectangular microtubes, *Microscale Thermophys. Eng.* 2 (4) (1998) 273–282.
- [8] E.B. Arkilic, K.S. Breuer, M.A. Schmidt, Mass flow and tangential momentum accommodation in silicon micromachined channels, *J. Fluid Mech.* 437 (2001) 29–43.
- [9] J.C. Harley, Y. Huang, H.H. Bau, J.N. Zemel, Gas flow in micro-channels, *J. Fluid Mech.* 284 (1995) 257–274.
- [10] J.C. Shih, C.-M. Ho, J. Liu, Y.-C. Tai, Monatomic and polyatomic gas flow through uniform microchannels, vol. DSC-59, ASME, New York, 1996, pp. 197–203.
- [11] J. Liu, Y.-C. Tai, C.-M. Ho, MEMS for pressure distribution studies of gaseous flows in microchannels, in: *An Investigation of Micro Structures, Sensors, Actuators, Machines, and Systems*, 8th Ann. Int. Workshop MEMS, IEEE, Amsterdam, 1995, pp. 209–215.
- [12] A.K. Sreekanth, Slip flow through long circular tubes, in: L. Trilling, H.Y. Wachman (Eds.), *6th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*, Academic Press, New York, 1969, pp. 667–680.
- [13] E.S. Piekos, K.S. Breuer, Numerical modeling of micromechanical devices using the direct simulation Monte Carlo method, *J. Fluids Engrg.* 118 (1996) 464–469.
- [14] S. Chapman, T.G. Cowling, *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*, University Press, Cambridge, 1952.
- [15] R.G. Deissler, An analysis of second-order slip flow and temperature-jump boundary conditions for rarefied gases, *Int. J. Heat Mass Transfer* 7 (1964) 681–694.
- [16] P. Lalonde, *Etude expérimentale d'écoulements gazeux dans les microsystèmes à fluides*, Institut National des Sciences Appliquées de Toulouse, Thèse de Doctorat, Toulouse. 2001.
- [17] C. Aubert, S. Colin, High-order boundary conditions for gaseous flows in rectangular microchannels, *Microscale Thermophys. Eng.* 5 (1) (2001) 41–54.

- [18] J. Maurer, P. Tabeling, P. Joseph, H. Willaime, Second-order slip laws in microchannels for helium and nitrogen, *Phys. Fluids* 15 (9) (2003) 2613–2621.
- [19] S. Colin, P. Lalonde, R. Caen, Validation of a second-order slip flow model in rectangular microchannels, *Heat Transfer Engrg.* 25 (3) (2004) 23–30.
- [20] A. Beskok, G.E. Karniadakis, A model for flows in channels, pipes, and ducts at micro and nano scales, *Microscale Thermophys. Eng.* 3 (1) (1999) 43–77.
- [21] H. Xue, Q. Fan, A new analytic solution of the Navier–Stokes equations for microchannel flow, *Microscale Thermophys. Eng.* 4 (2) (2000) 125–143.
- [22] D. Jie, X. Diao, K.B. Cheong, L.K. Yong, Navier–Stokes simulations of gas flow in micro devices, *J. Micromech. Microengr.* 10 (3) (2000) 372–379.
- [23] T.G. Elizavora, Y.V. Sheretov, Theroretical and numerical investigation of quasi-gasdynamic and quasi-hydrodynamic equations, *Comput. Math. Math. Phys.* 41 (2) (2001) 219–234.
- [24] T.G. Elizavora, Y.V. Sheretov, Analyse du problème de l'écoulement gazeux dans les microcanaux par les équations quasi hydrodynamiques, in: *Microfluidique. Micro-écoulements liquides et gazeux : phénomènes physiques et applications*, SHF, 2002, pp. 309–318.
- [25] S. Colin, T.G. Elizavora, Y.V. Sheretov, J.-C. Lengrand, H. Camon, Micro-écoulements gazeux : validation expérimentale de modèles QHD et de Navier–Stokes avec conditions aux limites de glissement, in: *16ème Congrès Français de Mécanique, Actes sur CD ROM*, Nice, 2003.
- [26] H. Grad, On the kinetic theory of rarefied gases, *Comm. Pure Appl. Math.* 2 (1949) 331–407.
- [27] F. Sharipov, V. Seleznev, Data on internal rarefied gas flows, *J. Phys. Chem. Ref. Data* 27 (3) (1998) 657–706.
- [28] P. Bhatnagar, E. Gross, K. Krook, A model for collision processes in gasses, *Phys. Rev.* 94 (1954) 511–524.
- [29] C. Cercignani, R. Illner, M. Pulvirenti, *The Mathematical Theory of Dilute Gases*, vol. 106, Springer-Verlag, New-York, 1994.
- [30] E.P. Muntz, Rarefied gas dynamics, *Annu. Rev. Fluid Mech.* 21 (1989) 387–417.
- [31] H. Cheng, G. Emmanuel, Perspectives on hypersonic nonequilibrium flow, *AIAA J.* 33 (1995) 385–400.
- [32] G. Bird, Monte Carlo simulation of gas flows, *Annu. Rev. Fluid Mech.* 10 (1978) 11–31.
- [33] E.S. Oran, C.K. Oh, B.Z. Cybyk, Direct Simulation Monte Carlo: recent advances and applications, *Annu. Rev. Fluid Mech.* 30 (1998) 403–441.
- [34] C. Mavriplis, J.C. Ahn, R. Goulard, Heat transfer and flowfields in short microchannels using direct simulation Monte Carlo, *J. Thermophys. Heat Transfer* 11 (4) (1997) 489–496.
- [35] L.S. Pan, G.R. Liu, K.Y. Lam, Determination of slip coefficient for rarefied gas flows using direct simulation Monte Carlo, *J. Micromech. Microengr.* 9 (1) (1999) 89–96.
- [36] S. Stefanov, C. Cercignani, Monte Carlo simulation of a channel flow of a rarefied gas, *Eur. J. Mech. B Fluids* 13 (1) (1994) 93–114.
- [37] J.-S. Wu, K.-C. Tseng, Analysis of micro-scale gas flows with pressure boundaries using direct simulation Monte Carlo method, *Comput. & Fluids* 30 (6) (2001) 711–735.
- [38] M.L. Hudson, T.J. Bartel, DSMC simulation of thermal transpiration and accommodation pumps, in: R. Brun, R. Campargue, R. Gatignol, J.-C. Lengrand (Eds.), *Rarefied Gas Dynamics*, vol. 1, Cépaduès, 1999, pp. 719–726.
- [39] C.S. Chen, S.M. Lee, J.D. Sheu, Numerical analysis of gas flow in microchannels, *Numer. Heat Transfer A* 33 (1998) 749–762.
- [40] J. Fan, C. Shen, Statistical simulation of low-speed unidirectional flows in transition regime, in: R. Brun, R. Campargue, R. Gatignol, J.-C. Lengrand (Eds.), *Rarefied Gas Dynamics*, vol. 2, Cépaduès, 1999, pp. 245–252.
- [41] L.S. Pan, T.Y. Ng, D. Xu, K.Y. Lam, Molecular block model direct simulation Monte Carlo method for low velocity microgas flows, *J. Micromech. Microengr.* 11 (3) (2001) 181–188.
- [42] R. Roveda, D. Goldstein, P. Varghese, Hybrid Euler/particle approach for continuum/rarefied flows, *J. Spacecraft and Rockets* 35 (3) (1998) 258–265.
- [43] D. Hash, H. Hassan, Two-dimensional coupling issues of hybrid DSMC/Navier–Stokes solvers, *Phys. Rev. E* 55 (1997) 6333–6336.
- [44] S. Chen, G. Doolen, Lattice Boltzmann method for fluid flows, *Annu. Rev. Fluid Mech.* 30 (1998) 329.
- [45] E.P. Muntz, S.E. Vargo, Microscale vacuum pumps, in: M. Gad-el-Hak (Ed.), *The MEMS Handbook*, CRC Press, New York, 2002, pp. 29.1–29.28.
- [46] S.E. Vargo, E.P. Muntz, An evaluation of a multiple-stage micromechanical Knudsen compressor and vacuum pump, in: *Proceedings of the 20th Rarefied Gas Dynamics Conference*, Beijing, 1997, pp. 995–1000.
- [47] S.K. Loyalka, S.A. Hamoodi, Poiseuille flow of a rarefied gas in a cylindrical tube: solution of linearized Boltzmann equation, *Phys. Fluids A* 2 (11) (1990) 2061–2065.
- [48] S.E. Vargo, E.P. Muntz, Comparison of experiment and prediction for transitional flow in a single-stage micromechanical Knudsen compressor, in: R. Brun, R. Campargue, R. Gatignol, J.-C. Lengrand (Eds.), *Rarefied Gas Dynamics*, vol. 1, Cépaduès, 1999, pp. 711–718.
- [49] S.E. Vargo, E.P. Muntz, G.R. Shifflett, W.C. Tang, Knudsen compressor as a micro- and macroscale vacuum pump without moving parts or fluids, *J. Vac. Sci. Technol. A* 17 (4) (1999) 2308–2313.
- [50] R.M. Young, Analysis of a micromachine based vacuum pump on a chip actuated by the thermal transpiration effect, *J. Vac. Sci. Technol. B* 17 (2) (1999) 280–287.
- [51] J.P. Hobson, Accommodation pumping – a new principle for low pressure, *J. Vac. Sci. Technol.* 7 (2) (1970) 301–357.
- [52] J.P. Hobson, Analysis of accommodation pumps, *J. Vac. Sci. Technol.* 8 (1) (1971) 290–293.
- [53] J.P. Hobson, Physical factors influencing accommodation pumps, *J. Vac. Sci. Technol.* 9 (1) (1972) 252–256.
- [54] Y. Mitsuya, Modified Reynolds equation for ultra-thin film gas lubrication using 1,5-order slip-flow model and considering surface accommodation coefficient, *J. Tribol.* 115 (1993) 289–294.